Ferdowsi University of Mashhad

Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics

Page Journal: mechanic-ferdowsi.um.ac.ir

Society of Manufacturing Engineering of Iran

Analyzing the Mechanical Properties of Aluminum-Graphene Nanocomposite with Vacancy and Pin-Holed Defects by Molecular Dynamics Method

Research Article

Ali Ebrahimi[1], Masoud Ajri[2]

DOI: 10.22067/jacsm.2024.84337.1206

Abstract *The present study investigated mechanical properties such as Young's modulus and tensile strength of aluminum nanocomposite reinforced with defective graphene with vacancy and hole defects under uniaxial tension using molecular dynamics simulation. Also, the effect of the number of graphene layers in a constant volume ratio on the mechanical behavior of the nanocomposite has also been obtained. This simulation was done with the help of the LAMMPS open-source package by modeling a periodic system with NVE and NPT ensembles. The AIREBO and MEAM potentials were used to describe the interaction of carbon and aluminum atoms, respectively, and Lennard Jones potential was used for the interaction between these atoms. The obtained results show that adding a single layer of graphene to the structure of pure aluminum has improved Young's modulus and tensile strength of pure aluminum by 220 and 320%, respectively. In addition, it is observed that the effect of pinhole and vacancy defects on Young's modulus and tensile strength is non-linear and has a decreasing trend.*

Key Words nanocomposite, mechanical properties, molecular dynamics, graphene, vacancy defects.

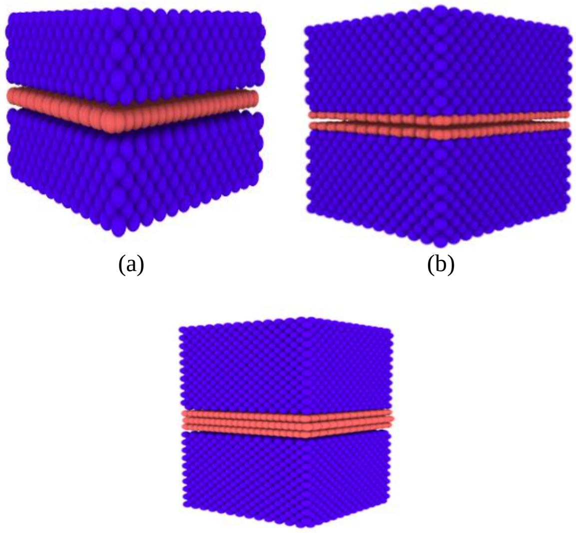
1-Introduction

A two-dimensional honeycomb structure of carbon atoms that make up graphene sheets has extraordinary mechanical properties found as reinforcements in various composites. Considering the increasing progress of composites, investigating the mechanical properties of graphene-reinforced composites is one of the significant goals of researchers in this field. In 2017, Makhalingam and Kumar assessed the mechanical properties of aluminum-graphene nanocomposite [1]. In the mentioned research, the effect of structural defects and the number of layers on the mechanical properties has yet to be investigated, and the reported results are limited to Young's modulus of nanocomposite. In the present study, the mechanical properties of graphene-reinforced aluminum nanocomposite under uniaxial tensile test, as well as the effect of vacancy defects and hole defects in the graphene layer and the number of graphene layers on Young's modulus and tensile strength of the nanocomposite, have been investigated.

2- Modeling

The nano molecular unit cell (NUC) for MD simulation is shown in Figure 1. In this simulation, periodic boundary conditions are used in all three directions. The volume fraction of carbon is 5%, and the dimensions of the nanocomposite are 51 angstroms in the *x* and y directions and 28.35 angstroms in the *z* direction. In the present study, interatomic potentials (MEAM), (AIREBO), and (L-J) were used. The time step value of 0.5 femtosecond was considered for all the simulated models and the atoms under the microcanonical set (NVE) at 300 Kelvin were balanced with a Langevin thermostat. Afterward, zero load pressure was applied using the NPT ensemble to release the initial internal stresses

.



(a) (b)

(c)

Figure 1. Atomic model showing the structure of graphene aluminum nanocomposite (AL-Gs) a) single-layer graphene, b) double-layer graphene, and c) three-layer graphene

*Manuscript received: September 30, 2023. Revised, November 7, 2023, Accepted, January 14, 2024.

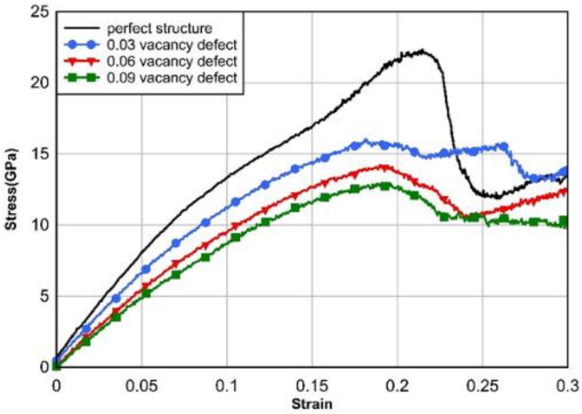
[1] M.Sc student, Department of Mechanical Engineering, University of Mohaghegh Ardabili, Iran.

[2] Corresponding Author. Assistant Professor, Department of Mechanical Engineering, University of Mohaghegh Ardabili, Iran.

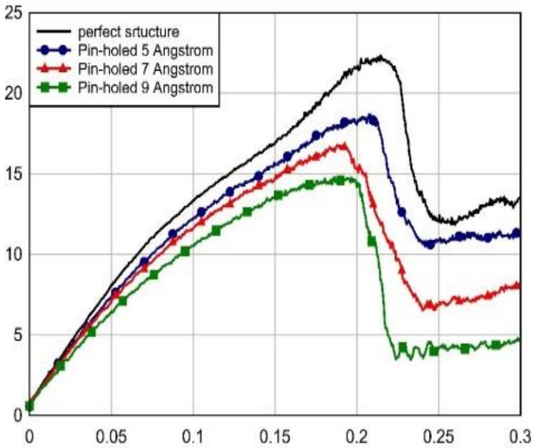
:**Email**: m.ajri@uma.ac.ir

3- Results

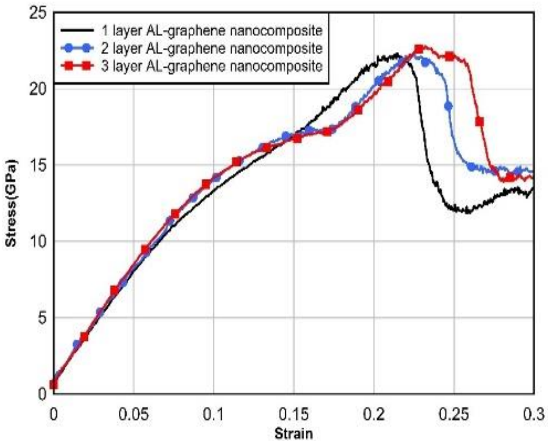
Figure 2 investigated the effect of vacancy defects, pinhole defects, and the number of layers on the stress-strain diagram. It can be seen that with an increase in the atomic percentage of vacancy defects and radius of the pinhole defects, Young's modulus and ultimate stress decreased. However, by augmenting the number of graphene layers, the mechanical properties of graphene-aluminum nanocomposite improved.



(a)



(b)



(c)

Figure 2. Stress-strain curves a) comparison of the effect of vacancy defect, b) effect of pinhole defect, and c) effect of number of layers

In Tables 1-3, the nanocomposite Young's modulus and ultimate stress are given for all the states investigated in this research. For nanocomposite with 3, 6, and 9 percent vacancy defects, Young's modulus is 129.6, 116.8, and 102.4 GPa, respectively, which decreased by 15.2%, 23.6%, and 33%, respectively, compared to the perfect sample. Moreover, for the nanocomposite with pinhole defects with a radius of 5, 7, and 9 angstroms, Young's modulus is 140, 135.4, and 120.59 GPa, respectively. Compared to the perfect sample, it decreased by 8.4%, 11.5%, and 21.1%, respectively. Moreover, Young's modulus for nanocomposites with one-, two-, and three-layer graphene increased to 153, 157.7, and 159.7 GPa, respectively, which shows 218%, 225%, and 228% improvement, respectively, compared to the pure aluminum sample.

Table 1. Young's modulus and ultimate strength of graphene-reinforced aluminum nanocomposite with vacancy defect

Vacancy Defect %	Young's Modulus (GPa)	Ultimate Stress (GPa)
3%	129.6	16
6%	116.8	15.1
9%	102.4	14.7

Table 2. Young's modulus and ultimate strength of graphene-reinforced aluminum nanocomposite with pinhole defect

Pinhole radius	Young's Modulus (GPa)	Ultimate Stress (GPa)
5 Angstrom	140	18.6
7 Angstrom	135.4	16.7
9 Angstrom	120.6	14.5

Table 3. Young's modulus and tensile strength of pure aluminum and graphene aluminum nanocomposites (AL-GS)

sample	Young's Modulus (GPa)	Ultimate Stress (GPa)
Pure AL	70	7
AL-Gs (single layer)	153	22.3
AL-Gs (double-layer)	157.7	22.4
AL-Gs (three-layer)	159.7	22.8

4- Conclusion

Adding a graphene layer to the pure aluminum nanostructure increased Young's modulus and tensile strength of pure aluminum significantly. However, the vacancy defect decreased Young's modulus and tensile strength of the nanocomposite. As a result, for a nanocomposite with vacancy defects equal to 3, 6, and 9, Young's modulus values were obtained as 129.6, 116.8, and 102.4 GPa, respectively. In addition, the pinhole defect decreased Young's modulus and tensile strength of the nanocomposite. For example, for a nanocomposite with a pinhole radius of 5, 7, and 9 angstroms, Young's modulus values were 140, 135.4, and 120.59 GPa, respectively. Finally, the behavior of vacancy and pinhole defects effects on Young's modulus and tensile strength value were non-linear with a decreasing trend.

علوم کاربردی و محاسباتی در مکانیک،۳۶، ۳، ۱۴۰۳. (۴۸-۳۳)

علوم کاربردی و محاسباتی در مکانیک

http://mechanic-ferdowsi.um.ac.ir

انجمن مهندسی ساخت و تولید ایران

دانشگاه فردوسی مشهد

تحلیل خواص مکانیکی نانوکامپوزیت آلومینیوم- گرافین با نقص جای خالی و حفره به روش دینامیک مولکولی*

مقاله پژوهشی

علی ابراهیمی(۱)　مسعود اجری(۲)

DOI: 10.22067/jacsm.2024.84337.1206

چکیده مطالعه حاضر، خواص مکانیکی از جمله مدول یانگ و تنش استحکام کششی نانوکامپوزیت آلومینیوم تقویت شده با گرافین ناقص با نقص حفره و نقص جای خالی تحت کشش تک محوره با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار داده است. همچنین در این مطالعه اثر تعداد لایه‌های گرافن در درصد حجمی ثابت، بر روی رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت نیز بررسی شده است. این شبیه‌سازی با کمک پکیج منبع باز لمپس با مدل‌سازی یک سیستم دوره‌ای با هنگرد NVE و NPT انجام گرفته و برای توصیف اندرکنش اتم‌های کربن و آلومینیوم به ترتیب از پتانسیل‌های AIREBO و MEAM و همچنین برای اندرکنش بین این اتم‌ها از پتانسیل لناردجونز استفاده شده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهند که افزودن تک لایه گرافین به ساختار آلومینیوم خالص باعث بهبود مدول یانگ و استحکام کششی آلومینیوم خالص به ترتیب به میزان ۲۲۰ و ۳۲۰ درصد شده است. علاوه بر این مشاهده می‌شود که اثر نقص جای خالی و نقص حفره بر روی مدول یانگ و استحکام کششی به‌صورت غیر خطی بوده و روند کاهشی دارد.

واژه‌های کلیدی نانوکامپوزیت، خواص مکانیکی، دینامیک مولکولی، گرافین، نقص جای خالی.

مقدمه

یک ساختار دوبعدی لانه‌زنبوری از اتم‌های کربن (C) که ورقه گرافین (GS) را ایجاد می‌کنند دارای خواص مکانیکی فوق‌العاده‌ای می‌باشد [1,2]. این آلوتروپ کربن تقریبا به صورت تئوری هشت دهه مورد مطالعه قرار گرفته است [3,4]. اگرچه نانوصفحات گرافین به طور ذاتی در کامپوزیت‌ها یافت شدند اما فرض بر این بود که GSها نسبت به تشکیل نانوساختارهای کربنی منحرف‌شده مانند نانولوله‌ها و فولرن‌ها ناپایدار هستند [5]. در سال ۲۰۰۴، نووسلوف و همکارانش GSها را با تست‌های آزمایشگاهی مورد مطالعه قرار دادند و مسیر جدیدی از علم نانو را برای محققان در سراسر جهان گشودند [6]. خواص مکانیکی GSها تقریبا مشابه همتای خود، یعنی نانولوله‌های کربنی (CNTs) است. با این حال، به دلیل نسبت ابعاد بالاتر، مساحت سطح و تولید کم‌هزینه GSها به‌عنوان نانوپرکننده تقویت‌کننده به CNTها ترجیح داده می‌شوند. با تقویت GSها برحسب وزن یا حجم کسری در پلیمرها، رفتار مکانیکی کامپوزیت مواد به طور قابل توجهی افزایش می‌یابد [7]. GSها در مقایسه با CNTها سطح بیشتری دارند و با مواد ماتریس در هر دو سطح متصل شود. ساختار دوبعدی GS پیوند بهتری با مواد ماتریس دارد و یک فصل مشترک بزرگ‌تر را در ارتباط بین GS و مواد ماتریس نسبت به CNT تشکیل می‌دهد که در نهایت ایجاد فصل مشترک بزرگ‌تر به خواص مکانیکی بهتر منجر خواهد شد [8,9]. به‌عنوان

*تاریخ دریافت مقاله ۱۴۰۲/۷/۸ و تاریخ پذیرش آن ۱۴۰۲/۱۰/۲۴ می‌باشد.

(۱) دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه محقق اردبیلی، ایران

(۲) نویسنده مسئول: استادیار گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه محقق اردبیلی، ایران

Email: m.ajri@uma.ac.ir

مثال تقویت ۳ درصد وزنی GS در پلی‌اتیلن (PE) منجر به افزایش استحکام کششی و مدول الاستیک کامپوزیت به ترتیب نزدیک به ۷۷ و ۸۷ درصد می‌شود. اما، برای همان کسر وزنی تقویت‌کننده CNT در پلی‌اتیلن استحکام کششی و مدول الاستیک ماتریس پلی‌اتیلن را تنها به میزان ۵۸٪ و ۵۷٪ افزایش می‌دهد [10]. خواص مکانیکی فشاری و کششی نانوپرکننده‌های مبتنی بر کربن توسط تعدادی از محققان به‌صورت تجربی و با استفاده از آزمایش‌های عددی از جمله شبیه‌سازی مولکولی مورد مطالعه قرار گرفت [11,12].

با میدان‌های نیروی تجربی کمتر توسعه‌یافته، تکنیک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD) نقش اساسی در تجزیه و تحلیل پاسخ‌های مکانیکی نانوپرکننده‌ها و نانوکامپوزیت‌ها ایفا می‌کند [13-18]. لین و همکاران پاسخ کمانش نانوکامپوزیت پلیمری تقویت‌شده با GS را مورد بحث قرار داده‌اند و ثابت کرده‌اند که شبیه‌سازی‌های MD می‌توانند بینش بیشتری از دامنه کمانش و برهم‌کنش‌های میان نانوپرکننده‌ها و مواد ماتریس ارائه دهند که یافتن آن‌ها در آزمایش‌های مقیاس نانو دشوار است [19]. در نمونه‌های کاربردی، تقریبا تمام کامپوزیت‌های تقویت شده با GS با GS لایه‌ای تقویت شده‌اند [20]. چندین تحلیل توسط محققان در مورد نتایج تقویت GSهای چندلایه در مواد ماتریس بر رفتار مکانیکی مواد نانوکامپوزیت منتشر شده است [21,22]. در مقایسه با کامپوزیت‌های سرامیکی و پلیمری تقویت شده با GSها، کامپوزیت‌های فلزی تقویت شده با GS به دلیل مشکلاتی مانند توزیع یکنواخت، تولید انبوه نانوپرکننده‌های هم‌تراز و پیوند بین سطحی ضعیف کمتر مورد بررسی قرار می‌گیرند [23]. اما از بین فلزات موجود، آلومینیوم (Al) در بسیاری از کاربردها به دلیل چگالی کم، کارایی مناسب و خواص سختی آن به سایر مواد ترجیح داده شده است و پژوهش های فروانی روی آن صورت گرفته است [24,25]. کاربردهای بسیاری از نانوکامپوزیت‌های آلومینیوم در صنایع، خودروسازی و صنایع نظامی وجود دارد [26]. شین و همکاران یک کامپوزیت آلی تعبیه شده چندلایه GS با رویکرد متالورژی پودر توسعه دادند و ویژگی‌های مقاومت آن را بررسی کردند [27]. بر اساس روش MD، تحقیقات زیادی برای GSهای لایه‌ای و کامپوزیت‌های تقویت شده با GS لایه‌ای توسط محققان مختلف در سراسر جهان اجرا شده است و مشخص شده است که افزایش دما پیامد منفی بر خواص مکانیکی GSها دارد [28]. در سال ۲۰۲۰ صدیق و همکاران پژوهشی تحت عنوان بررسی نانوکامپوزیت‌های بورنیترید آلومینیوم انجام دادند. در خلال این پژوهش اثر عیب جای خالی مورد بررسی قرار گرفت. آن‌ها دریافتند که حضور نقص جای خالی در نانوکامپوزیت بورنیترید آلومینیوم منجر به افت خواص مکانیکی خواهد شد [29]. همچنین گزارش‌ها نشان می‌دهد که تشکیل عیوب نامطلوب در ساختارهای کریستالی یک مسئله اجتناب‌ناپذیر است، به‌خصوص زمانی که فرایندهای مکانیکی در روش سنتز آن‌ها دخالت داشته باشد. اگرچه وجود جای خالی خواص مغناطیسی را ارتقا می‌دهد اما عیوب ذکر شده ویژگی‌های مکانیکی این نانوساختارها را کاهش می‌دهد [30,31].

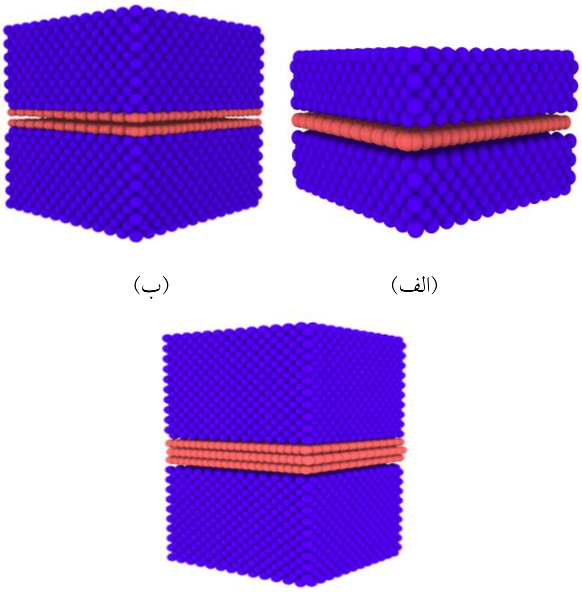
در سال ۲۰۱۷ در یک پژوهش انجام شده، مخالینگام و کومار به بررسی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین پرداختند. در این پژوهش که به نتایج محدودی ختم شده است، هیچ گونه نقص ساختاری و همچنین اثر تعداد لایه بر خواص مکانیکی مورد توجه قرار نگرفته است و نتایج گزارش شده محدود به مدول یانگ نانوکامپوزیت است [32]. به همین دلیل برای دستیابی به نتایج نزدیک به واقعیت، بررسی عیب‌ها در خلال شبیه‌سازی نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین امری ضروری است. با توجه به ضروریات ذکر شده، در این پژوهش به بررسی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت آلومینیوم تقویت شده با گرافین تحت تست کشش تک‌محوره در جهت x و همچنین تأثیر نقص جای خالی اعمال شده در لایه گرافین با درصدهای اتمی ۳، ۶ و ۹، تأثیر نقص حفره اعمال شده بر لایه گرافین با شعاع‌های ۵، ۷ و ۹ آنگستروم و همچنین اثر افزایش تعداد لایه فاز فیبر یعنی گرافین بر مدول یانگ و استحکام کششی نانوکامپوزیت پرداخته شده است.

مدل‌سازی سلول واحد نانو

مدل شبیه‌سازی

نانو سلول واحد مولکولی (NUC) برای شبیه‌سازی MD در شکل (۱) با یک، دو و سه لایه گرافین نشان داده شده است. برای ایجاد

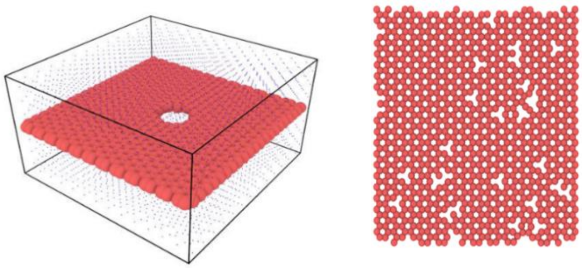
NUCدر شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، شرایط تناوبی در محورهای x، y و z استفاده می‌شود. کسر حجمی برای نانوسلول واحد ۵٪ با ابعاد ۵۱ آنگستروم در جهات x و y و ۲۸/۳۵ آنگستروم در جهت z در نظر گرفته شده است. به منظور بررسی آثار مکانیکی نقص جای خالی و نقص حفره، تست‌های کشش انجام شده روی نانوکامپوزیت به دو دسته مجزای بدون نقص و با نقص تقسیم‌بندی می‌شوند. تست‌های کشش در جهت x و با حضور نقص جای خالی با درصدهای اتمی ۳ ، ۶ و ۹ به‌صورت تصادفی و در ساختار گرافین در نظر گرفته شده است (شکل ۲- الف). همچنین به منظور انجام آزمون کشش نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین با نقص حفره، حفره‌هایی با شعاع ۵، ۷ و ۹ آنگستروم در وسط لایه گرافین ایجاد شده است (شکل ۲-ب) لازم به ذکر است که متناسب با افزایش تعداد لایه‌های گرافین، ابعاد نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین به منظور ثابت ماندن کسر حجمی در جهت z افزایش داده شده است.



(الف) (ب)

(ج)

شکل ۱ مدل اتمی نشان دهنده ساختار نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین: الف) گرافن تک لایه، ب) گرافین دولایه و ج) گرافین سه لایه



(الف) (ب)

شکل ۲ الف) نقص جای خالی ۳ درصد اتمی در ساختار گرافین نانوکامپوزیت، ب) حفره در ساختار گرافین نانوکامپوزیت

پتانسیل‌های بین اتمی

استفاده از پتانسیل بین اتمی صحیح در انجام شبیه‌سازی‌ها نقشی کلیدی دارد [33]. در مطالعه حاضر پتانسیل‌های بین اتمی زیر مورد استفاده قرار گرفته‌اند:

الف) برای اتم‌های آلومینیوم روش اتم تعبیه شده اصلاح شده (MEAM)، [34]

ب) برای اتم‌های کربن ترتیب پیوند تجربی واکنشی بین مولکولی تطبیقی(AIREBO) [35]

پ) برای تعاملات بین اتم‌های کربن و آلومینیوم لنارد-جونز [36] (L-J)

جدول ۱ پارامترهای مربوط به پتانسیل‌های بین اتمی [37]

پیوند آلومینیوم کربن با قانون اختلاط	پیوند کربن-کربن	پیوند آلومینیوم-آلومینیوم	پارامترهای پتانسیل لناردجونز
۰/۰۳۴۳۸	۲/۸۴۴۰	۰/۴۱۵۷	Ɛ (ev)
۳/۰۱۰۰	۳/۴۰۰۰	۲/۶۲۰۰	Ϭ (A^0)
			شعاع کات‌آف=3 ×$Ϭ_{AL-C}$ = $9.03A^0$

همچنین مقدار شـــعاع قطع معادل $3\sigma_{AL-C}$ در نظر گرفته می‌شود. انرژی کل مدل به صورت زیر نمایش داده می‌شود:

$$E_{total} = E_{AL}^{MEAM} + E_{C}^{AIREBO} + E_{LJ}^{AL-C} \quad (۱)$$

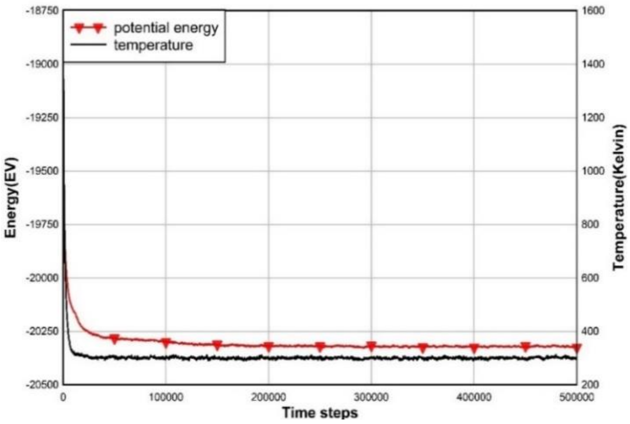
پتانسیل‌های مورد نیاز و پارامترهای مربوط (به عنوان مثال، شعاع واندروالس(σ) ، عمق چاه بالقوه (e) و برش شعاع) توسط چوی و همکاران مورد بحث قرار گرفته است و همچنین در جدول (۱) ذکر شده‌اند.

برای انجام شبیه‌سازی MD، کدهای منبع باز کاربر پسند و قابل اعتماد مختلفی مثل LAMMPS، CHARMM، NAMD، AMBER، GROMACS، GROMOS به صورت رایگان در دسترس هستند [38]. با وجود نرم‌افزارهای شبیه‌سازی MD موجود، از کد LAMMPS به طور گسترده‌ای به دلیل تطبیق‌پذیری آن استفاده می‌شود. بنابراین در مطالعه حاضر، LAMMPS به عنوان ابزار شبیه‌سازی استفاده می‌شود [39].

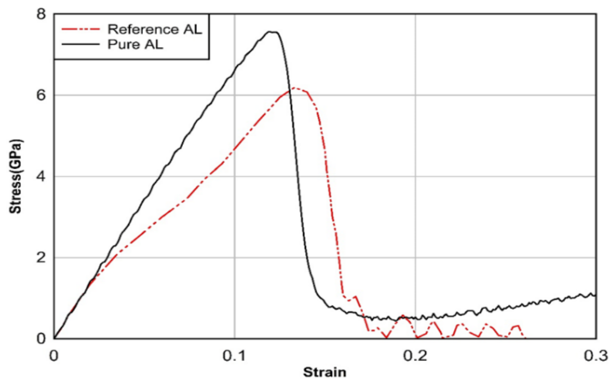
شرایط شبیه‌سازی

گام زمانی پس از هم‌گرایی نتایج در مقدار ۰/۵ فمتوثانیه برای همه مدل‌های شبیه‌سازی شده در نظر گرفته شد و اتم‌ها تحت مجموعه میکروکانونیکال (NVE) در دمای ۳۰۰ کلوین با ترموستات لانگوین متعادل می‌شوند. پس از آن برای آزاد کردن تنش‌های داخلی اولیه، فشار صفر بار با استفاده از آنسامبل NPT اعمال شد. همان طور که در شکل (۳) مشخص است، اتم‌ها پس از طی کردن پانصد هزار گام زمانی، به سطح کمینه انرژی خود رسیده و از آنجا که پایداری سیستم وابسته به انرژی پتانسیل است، این نمودار نشان از به تعادل رسیدن سیستم اتمی دارد. همچنین دمای سیستم شبیه‌سازی شده، به خوبی در ناحیه ۳۰۰ کلوین قرار گرفته است.

در مرحله اول اعتبارسنجی رویکرد شبیه‌سازی MD آلومینیوم خالص در مقاله حاضر با مقایسه نتایج نمودار تنش-کرنش و مدول یانگ با نتایج منتشر شده در مقاله رونگ و همکاران (شکل ۴) انجام شده است [40]. رونگ و همکاران مدول ۷۴٫۷۸ گیگاپاسکال را گزارش کردند و در شرایط شبیه‌سازی مشابه، مطالعه حاضر مدول ۷۰ گیگاپاسکال را گزارش می‌کند از این رو دقت روش فعلی تأیید شده است.



شکل ۳ آرامش انرژی پتانسیل و دما ساختار نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین تک‌لایه

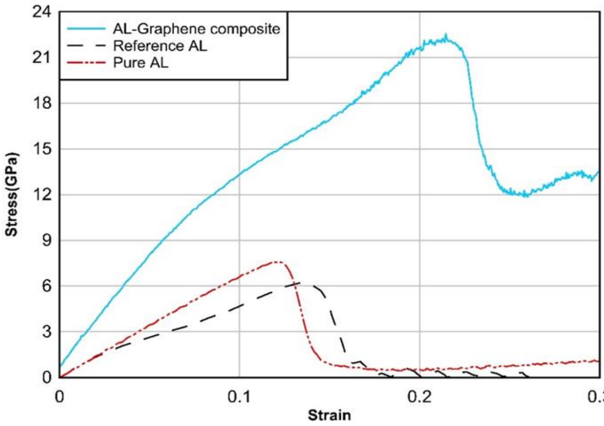


شکل ۴ نمودار مقایسه تنش کرنش آلومینیوم خالص با مقاله مرجع [40]

نتایج و بحث

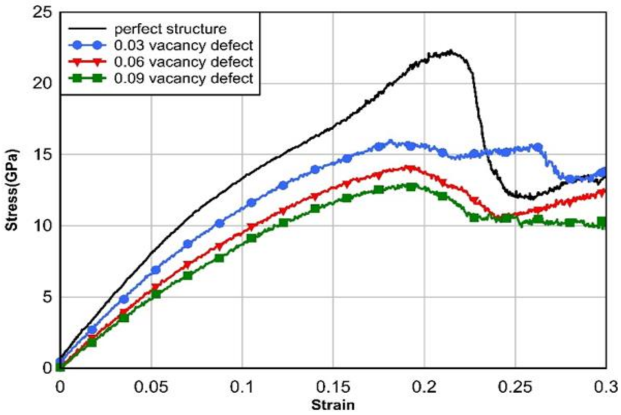
ویژگی‌های مکانیکی نانوکامپوزیت آلومینیوم تقویت‌شده با گرافین توسط آزمایش‌های عددی MD و با استفاده از مرزهای تناوبی با شرایط کسر حجمی ۵ درصد برای فاز فیبر محاسبه شد. نتایج منحنی‌های تنش کرنش که توسط شبیه‌سازی رایانه‌ای MD یافت شده، در شکل‌های زیر نشان داده شده است. همان طور که پیش‌تر گفته شد، همه ساختارهای کریستالی در شبکه خود دارای حفره‌ها و نقص‌هایی هستند که برای دستیابی به نتایج واقعی و قابل اعتمادتر لازم است اثرات آن‌ها بررسی شوند. در این پژوهش سه تست کشش برای نانوساختار با نقص جای خالی و درصدهای اتمی ۳ ، ۶ و ۹ در ساختار گرافین، سه تست کشش با حضور نقص حفره اعمال شده در لایه گرافین با شعاع ۵ ، ۷ و ۹ و همچنین تست کشش با تقویت یک، دو و سه لایه گرافین انجام گرفته شد. در شکل (۵)، نتایج حاصل از آزمون کشش تک‌محوره نانوکامپوزیت بدون نقص آلومینیوم گرافین تک‌لایه با آزمون کشش آلومینیوم خالص و نمونه مرجع مقایسه شده است.

برای نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین بی‌نقص، مدول یانگ ۱۵۳ گیگا پاسکال و استحکام کششی ۲۲/۵ گیگا پاسکال به دست آمد که در مقایسه با نمونه آلومینیوم خالص به ترتیب حدود ۲۲۰ و ۳۲۰ درصد افزایش مشاهده می‌شود. مقادیر تنش نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین در حین بارگذاری روند صعودی دارند تا در کرنش ۰/۲۲ گرافین دچار گسیختگی می‌شود در حالی که برای آلومینیوم خالص کرنشی که بیشترین تنش در آن اتفاق افتاده است، ۰/۱۳ می‌باشد. همچنین چقرمگی که معادل سطح زیر نمودار تنش کرنش است برای نانوکامپوزیت بسیار بیشتر از نمونه آلومینیوم خالص است.



شکل ۵ مقایسه نمودار تنش کرنش آلومینیوم خالص و نانوکامپوزیت آلومینیوم تقویت شده با گرافین

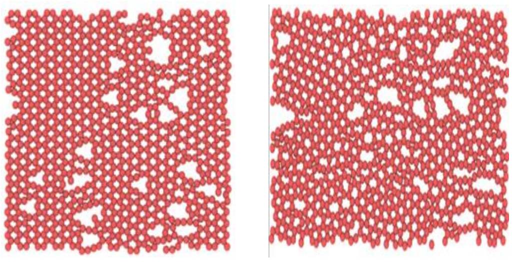
شکل (۶) منحنی‌های تنش کرنش نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای عیب جای خالی با درصدهای اتمی ۳، ۶ و ۹ را نشان می‌دهند که با نمونه نانوکامپوزیت بی‌عیب آلومینیوم گرافین تک‌لایه مقایسه شده‌اند. همان طور که دیده می‌شود اعمال نقص جای خالی با ۳ درصد اتمی در ساختار گرافین باعث کاهش شیب ناحیه خطی منحنی تنش کرنش و استحکام کششی نانوکامپوزیت شده است. همان طور که در نمودار (۶) مشخص است، نانوکامپوزیت دارای نقص جای خالی ۳ درصد اتمی بیشترین تنش خود را به مقدار ۱۶/۰۳ گیگاپاسکال در کرنش ۰/۱۸ تحمل کرده است که استحکام کششی در مقایسه با نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین بی‌نقص، ۲۸/۱۱ درصد کاهش یافته است. این کاهش به دلیل ضعف در ساختار لایه گرافین با توجه به اعمال نقص جای خالی ۳ درصد می‌باشد.



شکل ۶ مقایسه اثر نقص جای خالی بر مدول یانگ و استحکام کششی نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین با نمونه بی‌نقص

استحکام کششی برای نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای ۶ درصد نقص جای خالی، مقدار ۱/ ۱۵ گیگاپاسکال به دست آمد که در مقایسه با ساختار بی‌نقص آلومینیوم گرافین، ۳۲/۲ درصد کاهش پیدا کرده است. برای نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای نقص جای خالی ۹ درصد اتمی، استحکام کششی ۱۴/۷ گیگاپاسکال به دست آمد که در مقایسه با نمونه بی‌نقص به ترتیب ۳۴ درصد کاهش پیدا کرده است. بنابراین می‌توان بیان داشت که تنش حد نهایی نانوکامپوزیت سالم و بی‌نقص در حدود ۲۰۰ تا ۳۲۰ درصد افزایش پیدا کرده است و این روند با مشاهدات تجربی افزایش تنش حد نهایی در تست کشش کامپوزیت آلومینیوم- گرافن مطالعه آقای لی و همکارانش که افزایش ۲۰۰٪ در تنش حد نهایی را با افزودن ۰.۱٪ گرافن به ساختار آلومینیوم مشاهده کردن هم‌خوانی دارد [41] .علاوه بر این در همه نمونه‌های دارای نقص جای خالی با افزایش درصد اتمی نقص، شیب ناحیه خطی منحنی تنش کرنش کاهش پیدا کرده است. نکته قابل توجه در خصوص اعمال نقص جای خالی بر ساختار گرافین در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین مربوط به افت شدید خواص مکانیکی با اعمال نقص جای خالی بر لایه گرافین است.

اشکال (۷) تا (۹) رفتار کششی لایه گرافین دارای نقص جای خالی حین بارگذاری کششی را در گام‌های زمانی مختلف نشان می‌دهند که با اعمال هر چه بیشتر درصد اتمی نقص جای خالی، مشاهده می‌شود که تغییر شکل و گسیختگی ساختار گرافین زودتر رخ می‌دهد.

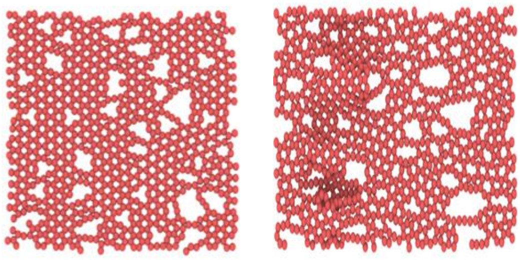


۲۵ پیکوثانیه ۱۰ پیکوثانیه

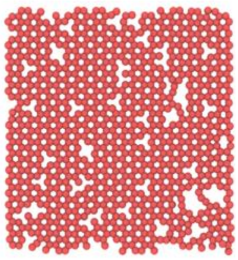


۰ پیکوثانیه

شکل ۷ رفتار کششی لایه گرافین دارای نقص جای خالی ۳ درصد در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین

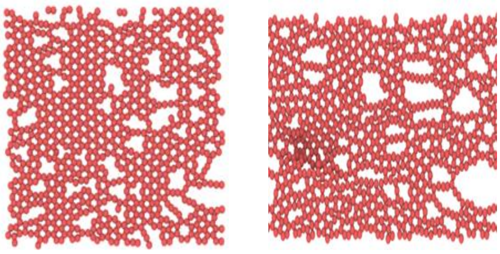


۲۵ پیکوثانیه ۱۰ پیکوثانیه

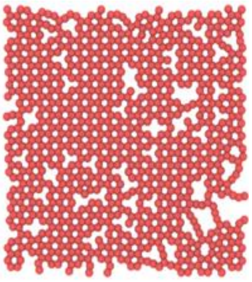


۰ پیکوثانیه

شکل ۸ رفتار کششی لایه گرافین دارای نقص جای خالی ۶ درصد در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین



۲۵ پیکوثانیه ۱۰ پیکوثانیه



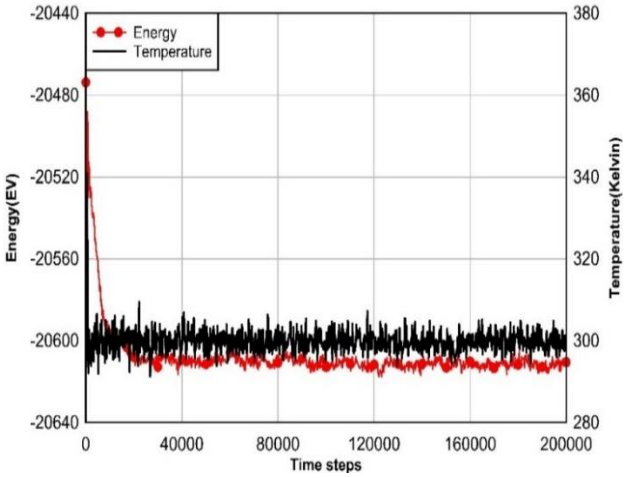
۰ پیکوثانیه

شکل ۹ رفتار کششی لایه گرافین دارای نقص جای خالی ۹ درصد در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین

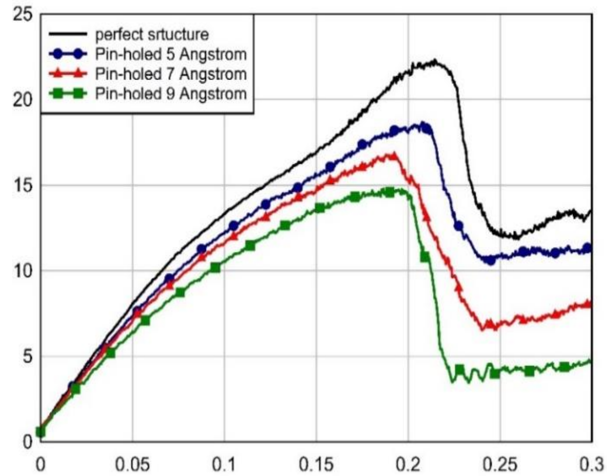
به‌منظور انجام آزمون کشش نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای نقص حفره در ساختار گرافین تک‌لایه که در شکل (۲- ب) مشخص است، سه نمونه با شعاع ۵، ۷ و ۹ آنگستروم ایجاد شده است. پس از ایجاد ساختارهای مورد نظر، آزمون کشش در جهت x روی ساختار کامپوزیت آلومینیوم تقویت‌شده با تک لایه گرافین دارای حفره اعمال شد. شکل (۱۰) نمودار تعادل دمایی و انرژی پتانسیل نانوساختار آلومینیوم گرافین دارای نقص حفره را نشان می‌دهد که در تمام مدت زمان شبیه سازی دما در محدوده ۳۰۰ کلوین نگه داشته شده است. علاوه بر این، انرژی پتانسیل ساختار در مقدار ۲۰۶۱۰- به سطح پایدار خود رسیده است. شکل (۱۱) منحنی‌های تنش- کرنش مربوط به ساختار کامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای نقص حفره با شعاع ۵، ۷ و ۹ و نقایسه آن با ساختار بی‌عیب نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین را نشان می‌دهد.

همان طور که در شکل (۱۱) مشخص است وجود نقص حفره در لایه گرافین باعث کاهش شیب ناحیه خطی منحنی تنش کرنش، استحکام کششی و مقدار کرنشی که بیشترین تنش در آن اتفاق می‌افتد، شده است. استحکام کششی برای ساختار کامپوز یت آلومینیوم گرافین دارای نقص حفره با شعاع ۵ آنگستروم ۱۸/۶ گیگاپاسکال به دست آمد که نسبت به ساختار کامل نانوکامپوزیت آلومینیم گرافین باعث افت ۱۶/۵ درصدی شده است. برای ساختار نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای نقص حفره با شعاع ۷ آنگستروم، مقدار استحکام کششی ۱۶/۶۷ گیگاپاسکال به دست آمد که در مقایسه با ساختار بی‌نقص نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین ۲۵/۲ درصد کاهش در استحکام کششی مشاهده می شود. در آخر و برای ساختار نانوکامپوزیت

آلومینیوم گرافین دارای نقص حفره با شعاع ۹ آنگستروم استحکام کششی مقدار ۱۴/۴۹ به دست آمد که در مقایسه با ساختار بی‌نقص نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین کاهش ۳۵ درصدی حاصل شد.

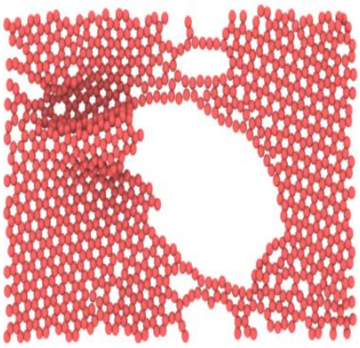


شکل ۱۰ نمودار تعادل دمایی و انرژی پتانسیل نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین تک‌لایه با نقص حفره

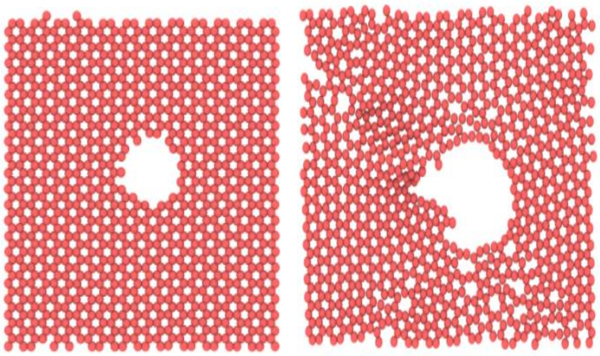


شکل ۱۱ نمودار مقایسه تنش-کرنش کامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای نقص حفره با نمونه بی‌نقص

از مقایسه نمودارها می‌توان دریافت که با اعمال نقص حفره در لایه گرافین خواص مکانیکی شیب ناحیه خطی افت کرده است و با افزایش شعاع حفره، مقدار کرنشی که بیشترین تنش در آن اتفاق می‌افتد، کاهش پیدا کرده است. به عنوان مثال، در منحنی تنش- کرنش نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین بی‌نقص این مقدار کرنش، ۰/۲۲ است، در حالی که برای نمونه دارای نقص حفره با شعاع ۹ این عدد مقدار ۰/۱۸ می‌باشد که این مهم، بیانگر آن است که نمونه‌های دارای نقص در اثر تنش کششی محوری زودتر دچار تغییر شکل می‌شوند. همچنین تغییر شکل لایه گرافین دارای نقص حفره با شعاع ۵، ۷ و ۹ آنگستروم حین آزمون کشش در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین در نمودارهای (۱۴-۱۲) نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که با افزایش شعاع حفره در ساختار گرافین در گام زمانی یکسان، گسیختگی بیشتری دیده می‌شود.

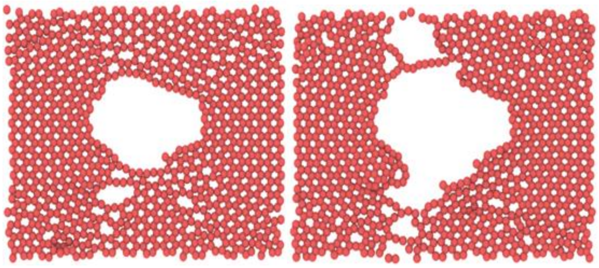


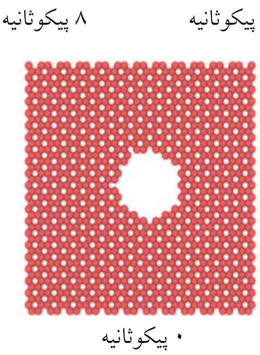
۱۷پیکوثانیه



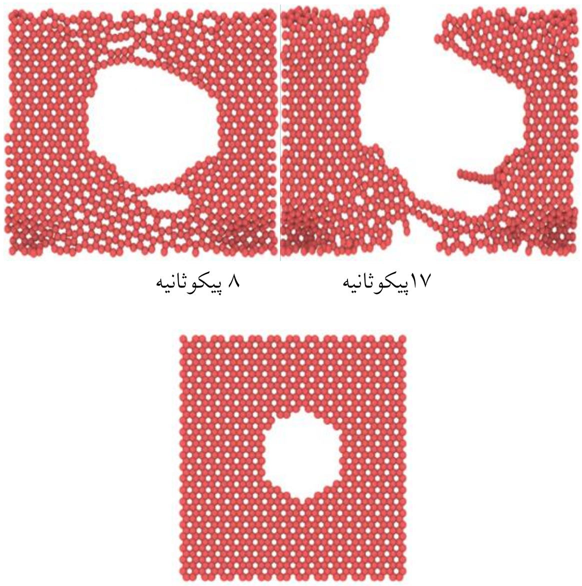
۰ پیکوثانیه ۸ پیکوثانیه

شکل ۱۲ رفتار کششی لایه گرافین دارای نقص حفره با شعاع ۵ آنگستروم در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین





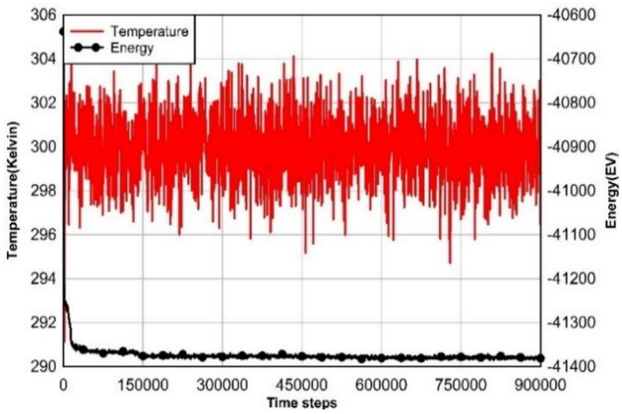
شکل ۱۳ رفتار کششی لایه گرافین دارای نقص حفره با شعاع ۷ آنگستروم در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین



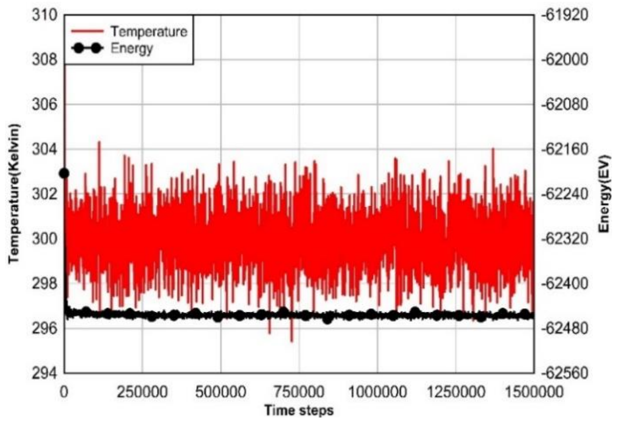
شکل ۱۴ رفتار کششی لایه گرافین دارای نقص حفره با شعاع ۹ آنگستروم در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین

همگرایی انرژی پتانسیل و دمای ساختار آلومینیوم گرافین تک‌لایه در شکل (۳) آورده شده است. در شکل‌های (۱۵) و (۱۶) نمودارهای تعادل دما و انرژی پتانسیل ساختارهای آلومینیوم گرافین دو و سه لایه آورده شده است. در شکل (۱۵) و (۱۶) به خوبی نشان داده شده است که در حین شبیه‌سازی، دمای سیستم اتمی به خوبی در حدود ۳۰۰ کلوین نگه داشته شده است. همچنین مقادیر انرژی پتانسیل به تعادل رسیده به ترتیب برای ساختار دو و سه لایه ۴۱۳۸۰- و ۶۲۴۶۰- الکترون ولت است. منحنی تنش کرنش نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین یک، دو و سه لایه در شکل (۱۷) آورده شده است. مشاهده می‌گردد که با افزایش تعداد لایه از یک به سه، مقدار کرنشی که بیشترین تنش در آن اتفاق می‌افتد، به سمت ارقام بزرگ‌تری میل می‌کند. همچنین نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دولایه در کرنش ۰/۲۴ بیشترین تنش خود را تحمل می‌کند در حالی که طبق شکل برای نانوساختار سه‌لایه این مقدار کرنش به ۰/۲۶ رسیده است و در حالت تک‌لایه این مقدار ۰/۲۲ است. این بدان معناست که با افزایش تعداد لایه گرافین، مقاومت نانوکامپوزیت در مقابل تغییر شکل افزایش پیدا خواهد کرد. همچنین با افزایش تعداد لایه‌های گرافین، شیب ناحیه خطی منحنی تنش- کرنش نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین افزایش می‌یابد. در خصوص استحکام کششی نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین باید گفت که این مقادیر هم همچون شیب ناحیه خطی منحنی تنش- کرنش، روند صعودی داشتند و با افزایش تعداد لایه، استحکام کششی هم افزایش یافت. به طوری که در نانوکامپوزیت تک‌لایه مقدار استحکام کششی ۲۲/۳ گیگاپاسکال به دست آمد. این عدد برای حالت دولایه نسبت به تک‌لایه ۱۰۰ مگاپاسکال رشد نشان داده است و مقدار ۲۲/۴ گیگاپاسکال گزارش می‌شود. در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین سه لایه مقدار استحکام کششی ۲۲/۸ گیگاپاسکال ثبت شد که نسبت به نمونه تک‌لایه به میزان ۵۰۰ مگاپاسکال رشد داشته است.

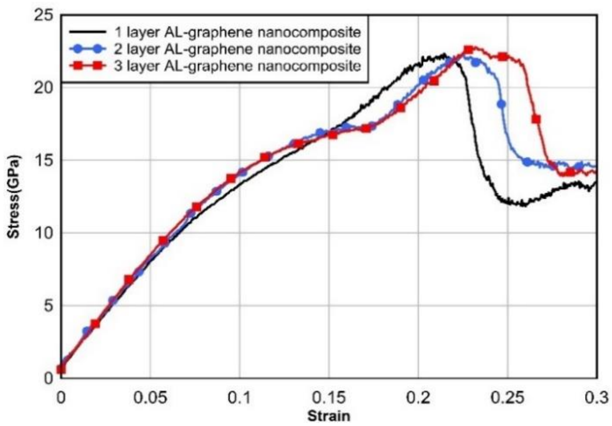
در جدول‌های (۴-۲) مقادیر مدول یانگ و تنش حد نهایی نانوکامپوزیت برای تمام حالت‌های بررسی شده در این پژوهش آورده شده است. مدول یانگ برای نانوکامپوزیت با نقص جای خالی ۳، ۶ و ۹ درصد اتمی به ترتیب ۱۲۹/۶، ۱۱۶/۸ و ۱۰۲/۴ گیگاپاسکال می‌باشد که نسبت به نمونه بی‌نقص به ترتیب ۱۵/۲، ۲۳/۶ و ۳۳ درصد کاهش یافته است. برای نانوکامپوزیت با نقص حفره با شعاع ۵، ۷ و ۹ آنگستروم مدول یانگ به ترتیب ۱۴۰، ۱۳۵/۴ و ۱۲۰/۵۹ گیگاپاسکال است در مقایسه با نمونه بی‌نقص به ترتیب ۸/۴، ۱۱/۵ و ۲۱/۱ درصد کاهش پیدا کرده است. همچنین مدول یانگ برای نانوکامپوزیت‌های آلومینیوم گرافین یک، دو و سه لایه روند صعودی داشت که به ترتیب مقادیر ۱۵۳، ۱۵۷/۷ و ۱۵۹/۷ گیگاپاسکال گزارش می‌شود که در مقایسه با نمونه آلومینیوم خالص به ترتیب ۲۱۸، ۲۲۵ و ۲۲۸ درصد افزایش پیدا کرده است.



شکل ۱۵ نمودار تعادل دمایی و انرژی پتانسیل نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دولایه



شکل ۱۶ نمودار تعادل دمایی و انرژی پتانسیل نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین سه‌لایه



شکل ۱۷ نمودار مقایسه تنش کرنش نانوکامپوزیت‌های آلومینیوم گرافین چندلایه

جدول ۲ مدول یانگ و استحکام حد نهایی نانوکامپوزیت آلومینیوم تقویت‌شده با گرافین دارای نقص جای خالی

نمونه	مدول یانگ (گیگاپاسکال)	استحکام کششی (گیگاپاسکال)
نقص جای خالی ۳ درصد اتمی	۱۲۹/۶	۱۶
نقص جای خالی ۶ درصد اتمی	۱۱۶/۸	۱۵/۱
نقص جای خالی ۹ درصد اتمی	۱۰۲/۴	۱۴/۷

جدول ۳ مدول یانگ و استحکام کششی نانوکامپوزیت آلومینیوم تقویت‌شده با گرافین دارای نقص حفره

نمونه	مدول یانگ (گیگاپاسکال)	استحکام کششی (گیگاپاسکال)
نقص حفره به شعاع ۵ آنگستروم	۱۴۰	۱۸/۶
نقص حفره به شعاع ۷ آنگستروم	۱۳۵/۴	۱۶/۷
نقص حفره به شعاع ۹ آنگستروم	۱۲۰/۶	۱۴/۵

جدول ۴ مدول یانگ و استحکام کششی آلومینیوم خالص و نانوکامپوزیت‌های آلومینیوم گرافین

نمونه	مدول یانگ (گیگاپاسکال)	استحکام کششی (گیگاپاسکال)
آلومینیوم خالص	۷۰	۷
نانوکامپوزیت با گرافین تک‌لایه	۱۵۳	۲۲/۳
نانوکامپوزیت با گرافین دولایه	۱۵۷/۷	۲۲/۴
نانوکامپوزیت با گرافین سه‌لایه	۱۵۹/۷	۲۲/۸

نتیجه‌گیری

در پژوهش حاضر، آزمون‌های کشش به کمک دینامیک مولکولی برای ارزیابی مدول یانگ و استحکام کششی نانوکامپوزیت آلومینیوم تقویت‌شده با گرافین انجام شد. سلول واحد در مقیاس

نانو برای پیش‌بینی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت آلومینیوم توسط لایه گرافین و همچنین اثر نقص جای خالی و نقص حفره، به دو صورت ساختار کامل و ساختارهای دارای نقص جای خالی ۳، ۶ و ۹ درصد اتمی و ساختار دارای نقص حفره با شعاع ۵ ، ۷ و ۹ آنگستروم شبیه‌سازی شد. همچنین برای بررسی اثر تعداد لایه گرافین بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیت، هر کدام از این ساختارها به‌صورت جداگانه ایجاد شدند. یافته‌های مهم بر اساس مطالعه حاضر عبارتند از:

۱. افزودن تک لایه گرافین به ساختار آلومینیوم خالص موجب افزایش قابل توجه مدول یانگ و استحکام کششی آلومینیوم خالص شد که برای نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین تک‌لایه این مقادیر ۱۵۳ و ۲۲/۳ گیگاپاسکال به دست آمد که در مقایسه با نمونه آلومینیوم خالص، به ترتیب ۲۱۸ و ۳۲۰ درصد افزایش یافته‌اند.

۲. تقویت ساختار آلومینیوم خالص به وسیله دو و سه‌لایه گرافین موجب افزایش مدول یانگ و استحکام کششی آلومینیوم خالص شد که برای نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دو و سه لایه، مقادیر مدول یانگ به ترتیب ۱۵۷/۷ و ۱۵۹/۷ به دست آمد که در مقایسه با آلومینیوم خالص ۲۲۵ و ۲۲۸ درصد افزایش مشاهده می‌شود. همچنین استحکام کششی برای نانوکامپوزیت آلومینیوم تقویت‌شده با دو و سه لایه گرافین مقادیر ۲۲/۴ و ۲۲/۸ به دست آمد که در مقایسه با آلومینیوم خالص به‌ترتیب ۲۹۸/۶ و ۳۰۴ درصد افزایش داشته است.

۳. نقص جای خالی باعث کاهش مدول یانگ و استحکام کششی نانوکامپوزیت شد. به طوری که برای نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای نقص جای خالی ۳ ، ۶ و ۹ درصد اتمی مقادیر مدول یانگ به ترتیب ۱۲۹/۶ ، ۱۱۶/۸ و ۱۰۲/۴ گیگاپاسکال به دست آمد که در مقایسه با نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین بی‌نقص به ترتیب ۱۵/۲ ، ۲۳/۶ و ۳۳ درصد کاهش پیدا کرده است. مقادیر استحکام کششی برای نانوکامپوزیت‌های دارای نقص جالی ۳ ، ۶ و ۹ درصد به ترتیب ۱۶/۰۳ ، ۱۵/۱ و ۱۴/۷ به دست آمد که در مقایسه با نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین بی‌نقص به ترتیب ۲۸/۱ ،۳۲/۲ و ۳۴ درصد کاهش مشاهده می‌شود.

۴. نقص حفره باعث کاهش مدول یانگ و استحکام کششی نانوکامپوزیت شد. به طوری که برای نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای نقص حفره با شعاع ۵ ، ۷ و ۹ آنگستروم به ترتیب مقادیر مدول یانگ ۱۴۰، ۱۳۵/۴ و ۱۲۰/۵۹ گیگاپاسکال به دست آمد که مدول یانگ در مقایسه با نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین بی‌نقص به ترتیب ۸/۴ ، ۱۱/۵ و ۲۱/۱ درصد کاهش پیدا کرده است. مقادیر استحکام کششی برای نانوکامپوزیت‌های دارای نقص حفره با شعاع ۵، ۷ و ۹ درصد به ترتیب ۱۸/۶ ، ۱۶/۶۷ و ۱۴/۴۹ به دست آمد که در مقایسه با نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین بی‌نقص به ترتیب ۱۶/۵ ،۲۵/۲ و ۳۵ درصد کاهش مشاهده می‌شود.

۵. رفتار اثر نقص جای خالی و نقص حفره بر روی مدول یانگ و استحکام کششی در سه آزمون گرفته‌شده برای هر دو ساختار به صورت غیر خطی ظاهر شد.

واژه نامه

ورقه‌های گرافن	Graphene sheet(GS)
نانوفولرن‌ها	Nanofullerenes
نانولوله‌های کربنی	Carbon nanotubes
پلی اتیلن	Polyethylene
استحکام کششی	Tensile strength
نقص جای خالی	Vacancy defect
سلول واحد نانومولکولی	Molecular Nano unit cell
دینامیک مولکولی	Molecular dynamics
گام زمانی	Time steps
شعاع قطع	Cuttof radius

تقدیر و تشکر

مراجع

[1] A. A. Balandin, “Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials,” *Nature Materials*, vol. 10, no. 8, pp. 569-581, (2011).

[2] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, J. Hone, "Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene," *Science*, vol. 321, no. 5887, pp. 385-388, (2008).

[3] M. Sharma, L. Johnson, and J. W. McClure, "Diamagnetism of graphite," *Physics Letters A*, vol. 44, no. 7, pp. 445-446, (1973).

[4] K. Mohammadi, H. Shokrollahi, "Application of SSPH Method in Free Vibration Analysis of Graphene," *Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics*, vol. 31, no. 2, pp. 53-66, (2020).

[5] E. Fradkin, "Critical behavior of disordered degenerate semiconductors. I. Models, symmetries, and formalism," *Physical Review B*, vol. 33, no. 5, p. 3257, (1986).

[6] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, "Electric field effect in atomically thin carbon films," *Science*, vol. 306, no. 5696, pp. 666-669, (2004).

[7] T. Kuilla, S. Bhadra, D. Yao, N. H. Kim, S. Bose, J. H. Lee, "Recent advances in graphene based polymer composites," *Progress in Polymer Science*, vol. 35, no. 11, pp. 1350-1375, (2010).

[8] H. Kim, C. W. Macosko, "Processing-property relationships of polycarbonate/graphene composites," *Polymer*, vol. 50, no. 15, pp. 3797-3809, (2009).

[9] S. Stankovich, D. A. Dikin, G. H. B. Dommett, K. M. Kohlhaas, E. J. Zimney, E. A. Stach, R. D. Piner, S. T. Nguyen, R. S. Ruoff, "Graphene-based composite materials," *Nature*, vol. 442, no. 7100, pp. 282-286, (2006).

[10] M. El Achaby, A. Qaiss, "Processing and properties of polyethylene reinforced by graphene nanosheets and carbon nanotubes," *Materials & Design*, vol. 44, pp. 81-89, (2013).

[11] I. Chang, B. C. Chiang, "Mechanical buckling of single-walled carbon nanotubes: Atomistic simulations," *Journal of Applied Physics*, vol. 106, no. 11, p. 1143313, (2009).

[12] M. Ayatollahi, S. Shadlou, and M. Shokrieh, "Multiscale modeling for mechanical properties of carbon nanotube reinforced nanocomposites subjected to different types of loading," *Composite Structures*, vol. 93, no. 9, pp. 2250-2259, (2011).

[13] M. A. Mostaan, J. Davoodi, H. Alizadeh, M. Yarifard, "Nontrivial tensile behavior of rutile TiO_2 nanowires: a molecular dynamics study," *The European Physical Journal B*, vol. 91, pp. 1-6, (2018).

[14] H. Alizadeh, M. A. Mostaan, N. Malih, J. Davoodi, "Size and shape dependent thermal properties of rutile TiO_2 nanoparticles: a molecular dynamics simulation study," *Molecular Simulation*, vol. 46, no. 5, pp. 341-349, (2020).

[15] M. Binghi, S. Rahnama, A. Dadrasi, "Analysis of fracture behavior of carbon nitride poly crystalline by genetic algorithm and molecular dynamics methods," *Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics*, vol. 36, no. 2, pp. 29-46, (2023), doi: 10.22067/JACSM.2023.83323.1192.

[16] A. Albooyeh, A. Dadrasi, M. Razavikia, "Investigation of the Effect of Geometric Defects and Temperature Changes on the Fracture Behavior of Boron Carbide Monocrystalline Structure by Molecular Dynamics," *Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics,* vol. 34, no. 27, pp. 37-48, (2022). doi:10.22067/JACSM.2023.83323.1192.

[17] M. A. H. Khotbesara, M. Ajri, M. Samadiyan, "Mechanical properties analysis of a monolayer biphenylene at different temperatures," *Journal of Modeling in Engineering*, vol. 22, no. 76, pp. 177-178, (2023).

doi:10.22075/JME.2023.31122.2485.

[18] M. Samadian, M. Ajri, A. zizi, M. A. H. Khotbesara, "Investigating the pinhole effect on the mechanical properties of biphenylene," *Applied Physics A*, vol. 129, pp.826-837 , (2023), doi: https://doi.org/10.1007/s00339-023-07112-z.

[19] F. Lin, Y. Xiang, and H. S. Shen, "Buckling of graphene embedded in polymer matrix under compression," *International Journal of Structural Stability and Dynamics*, vol. 15, no. 07, p. 1540016, (2015).

[20] Y. Y. Zhang, Y. T. Gu, "Mechanical properties of graphene: Effects of layer number, temperature and isotope," *Computational Materials Science*, vol. 71, pp. 197-200, (2013).

[21] Y. Song, Y. Chen, W. W. Liu, W. L. Li, Y. G. Wang, D. Zhao, X. B. Liu, "Microscopic mechanical properties of titanium composites containing multi-layer graphene nanofillers," *Materials & Design*, vol. 109, pp. 256-263, (2016).

[22] H. Wang, G. Xie, Z. Ying, Y. Tong, Y. Zeng, "Enhanced mechanical properties of multi-layer graphene filled poly (vinyl chloride) composite films," *Journal of Materials Science & Technology*, vol. 31, no. 4, pp. 340-344, (2015).

[23] H. Kwon, D. H. Park, J. F. Silvain, and A. Kawasaki, "Investigation of carbon nanotube reinforced aluminum matrix composite materials," *Composites Science and Technology*, vol. 70, no. 3, pp. 546-550, (2010).

[24] A. K. Srivastava, M. K. Dikshit, V. K. Pathak, L. Khurana, "A molecular dynamics study of the buckling behaviour of graphene-reinforced aluminum nanocomposite plate," *Materials Physics and Mechanics*, vol. 42, pp. 234-241, (2019).

[25] M. A. Farsi, A. R. Sehat, "Experimental and Numerical Study on Aluminum Damage Using a Nonlinear Model of Continuum Damage Mechanics," *Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics*, vol. 27, no. 2, pp. 41-54, (2016).

[26] A. Bashiri, M. Hosseini, H. Hatami, "Experimental and Numerical Analysis of Single and Double layered Aluminum Sheet 3105 With Mechanical Joints under Drop Weight Impact," *Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics*, vol. 30, no. 2, pp. 109-123, (2019).

[27] S. E. Shin, H. J. Choi, J. H. Shin, D. H. Bae, "Strengthening behavior of few-layered graphene/aluminum composites," *Carbon*, vol. 82, pp. 143-151, (2015).

[28] C. Li, A. R. Browning, S. Christensen, A. Strachan, "Atomistic simulations on multilayer graphene reinforced epoxy composites," *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, vol. 43, no. 8, pp. 1293-1300, (2012).

[29] P. Sedigh, A. Zare, A. Montazeri, "Evolution in aluminum applications by numerically-designed high strength boron-nitride/Al nanocomposites," *Computational Materials Science*, vol. 171, p. 109227, (2020).

[30] A. Du, Y. Chen, Z. Zhu, R. Amal, G. Q. Lu, S. C. Smith, "Dots versus antidots: computational exploration of structure, magnetism, and half-metallicity in boron− nitride nanostructures," *Journal of the American Chemical Society*, vol. 131, no. 47, pp. 17354-17359, (2009).

[31] Q. L. Xiong, Z. H. Li, X. G. Tian, "The defect-induced fracture behaviors of hexagonal boron-nitride monolayer nanosheets under uniaxial tension," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 48, no. 37, p. 375502, (2015).

[32] A. Mokhalingam, D. Kumar, A. Srivastava, "Mechanical behaviour of graphene reinforced aluminum nano composites," *Materials Today: Proceedings*, vol. 4, no. 2, pp. 3952-3958, (2017).

[33] S. N. A. Kalkhoran, M. Vahvadi, "The Effect of Interatomic Potential Function on Nanometric Machining of Single

Crystal Silicon," *Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics*, vol. 30, no. 2, pp. 17-32, (2019).

[34] E. Lee, B-J. Lee, "Modified embedded-atom method interatomic potential for the Fe–Al system," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 22, no. 17, p. 175702, (2010).

[35] S. J. Stuart, A. B. Tutein, J. A. Harrison, "A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 112, no. 14, pp. 6472-6486, (2000).

[36] A. Kumar Srivastava, V. Kumar Pathak, "Elastic properties of graphene-reinforced aluminum nanocomposite: Effects of temperature, stacked, and perforated graphene," *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part L: Journal of Materials: Design and Applications*, vol. 234, no. 9, pp. 1218-1227, (2020).

[37] B. K. Choi, G. H. Yoon, S. Lee, "Molecular dynamics studies of CNT-reinforced aluminum composites under uniaxial tensile loading," *Composites Part B: Engineering*, vol. 91, pp. 119-125, (2016).

[38] M. González, "Force fields and molecular dynamics simulations," *École thématique de la Société Française de la Neutronique*, vol. 12, pp. 169-200, (2011).

[39] S. Plimpton, "Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics," *Journal of Computational Physics*, vol. 117, no. 1, pp. 1-19, (1995).

[40] Y. Rong, H. He, L. Zhang, N. Li, Y. Zhu, "Molecular dynamics studies on the strengthening mechanism of Al matrix composites reinforced by grapnene nanoplatelets," *Computational Materials Science*, vol. 153, pp. 48-56, (2018).

[41] J. Li, Y. C. Xiong, X. D. Wang, S. J. Yan, C. Yang, W. W. He, J. Z. Chen, S. Q. Wang, X. Y. Zhang, S. L. Dai, "Microstructure and tensile properties of bulk nanostructured aluminum/graphene composites prepared via cryomilling," *Materials Science and Engineering: A*, vol. 626, pp. 400-405, (2015).